

GUÍA DOCENTE	M1. Introducción al Máster en Nanociencia y Nanotecnología Molecular: Conceptos básicos.
COURSE GUIDE	M1. Introduction to the Master on Molecular Nanoscience and Nanotechnology: Basic concepts

1.- FICHA IDENTIFICATIVA / COURSE DATA

Datos de la Asignatura / Data Subject

Código/Code	310850
ECTS	6
Curso académico/Academic year	2023-24

Profesor/ Professor	Univ	email	ECTS	Lesson
Untiedt, Carlos	UA	untiedt@ua.es	1,5	2
Sabater Piqueres, Carlos	UA	carlos.sabater@ua.es	1,5	2
García Martínez, Javier	UA	j.garcia@ua.es	3	1
Miranda, Rodolfo	UAM	rodolfo.miranda@imdea.org	1,5	2
Otero, Roberto (coord.)	UAM	roberto.otero@uam.es	1,5	2
Zamora, Félix	UAM	felix.zamora@uam.es	1,5	1
de la Escosura, Andres	UAM	andres.delaescosura@uam.es	1,5	1
Colino, José Miguel	UCLM	josemiguel.colino@uclm.es	3	2
Fandós, Rosa	UCLM	Rosa.Fandos@uclm.es	1	1
Langa, Fernando	UCLM	fernando.langa@uclm.es	2	1
González Platas, Javier	ULL	jplatas@ull.edu.es	3	2
Carrillo Fumero, Romen	ULL	rcarrillo@ipna.csic.es	3	1
Fernandez, Fernando	UMH	fdofdez@umh.es	3	1, 2
Sastre, Ángela	UMH	asastre@umh.es	3	1, 2
Efren Navarro	UV	efren.navarro@uv.es	3	2
Gaita, Alejandro	UV	gaita@uv.es	3	1
Rodríguez, Miguel Ángel	UVa	marrod@fmc.uva.es	2,5	2
García Cabezón, Cristina	UVa	crigar@eii.uva.es	1	1
Rodríguez, Mariluz (coord.)	UVa	mluz@uva.es	2,5	1

2.- RESUMEN / SUMMARY

Castellano
El objetivo de esta asignatura es asegurar una homogeneidad en conocimientos básicos de Química y de Física necesarios para la nanociencia independientemente de la formación previa que tengan los estudiantes matriculados.

English

The objective of this subject is to ensure that all the students share a certain degree of knowledge on Chemistry and Physics needed to understand the basic concepts of Nanoscience, regardless of the previous training that could have previously acquired.

3.- CONOCIMIENTOS PREVIOS / PREVIOUS KNOWLEDGE

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Relationship to other subjects of the same degree

There are no specified enrollment restrictions with other subjects of the curriculum.

4.- COMPETENCIAS / OUTCOMES

Cód	Competencia	Outcome
CB07	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.	Students can apply the knowledge acquired and their ability to solve problems in new or unfamiliar environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their field of study.
CB08	Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.	Students are able to integrate knowledge and handle the complexity of formulating judgments based on information that, while being incomplete or limited, includes reflection on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.
CB10	Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.	Students have the learning skills that will allow them to continue studying in a way that will be largely self-directed or autonomous.
CB6	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.	Students have the knowledge and understanding that provide a basis or an opportunity for originality in developing and/or applying ideas, often within a research context.
CE01	Que los estudiantes hayan adquirido los conocimientos y habilidades necesarias para seguir futuros estudios de doctorado en Nanociencia y Nanotecnología.	To possess the necessary knowledge and abilities to continue with future studies in the PhD program in Nanoscience and Nanotechnology.
CE02	Que los estudiantes de un área de conocimiento (p.e. física) sean capaces de comunicarse e interactuar científicamente con colegas de otras áreas de conocimiento (p.e. química en la resolución de problemas planteados por la Nanociencia y la Nanotecnología Molecular.	For students from field of knowledge (e.g. chemistry) to be able to scientifically communicate and interact with colleagues from another field (e.g. physics) in the resolution of problems laid out by the Molecular Nanoscience and Nanotechnology.
CE03	Conocer los fundamentos de física del estado sólido y de química supramolecular necesarios en nanociencia molecular.	To know the fundamentals of solid state physics and supramolecular chemistry necessary on molecular nanoscience.

CE04	Conocer las aproximaciones metodológicas utilizadas en Nanociencia	To know the methodological approaches used in Nanoscience.
-------------	--	--

5.- RESULTADOS DE APRENDIZAJE / LEARNING OUTCOMES

Castellano
<p>El objetivo de esta asignatura es asegurar una homogeneidad en conocimientos básicos de Química y de Física necesarios para la nanociencia independientemente de la formación previa que tengan los estudiantes matriculados. Estos normalmente procederán de grados científicos o tecnológicos tales como Biología, Bioquímica o Ingeniería Química, aparte de Química o Física, en los que los contenidos y objetivos de este curso se pueden haber obtenido en niveles muy diferentes.</p> <p>Se plantean para los alumnos que sigan el curso los siguientes objetivos:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de la estructura y enlace químicos de las moléculas, tanto inorgánicas como orgánicas, incluyendo las interacciones moleculares no enlazadas. 2. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de la Química Teórica y Computacional en relación con el objetivo anterior. 3. Obtener o demostrar conocimiento básico del cálculo de propiedades termodinámicas a partir de conceptos estadísticos. 4. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de la estructura y enlace en estado sólido. 5. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de la estructura electrónica en estado sólido. 6. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de la óptica física en relación con interacción entre la radiación electromagnética y el sólido. 7. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el lenguaje básico de las propiedades eléctricas y magnéticas.

English
<p>The objective of this subject is to ensure that all the students share a certain degree of knowledge on Chemistry and Physics needed to understand the basic concepts of Nanoscience, regardless of the previous training that could have previously acquired. This is necessary since most of the students would have a degree in scientific or technological topics such as Biology, Biochemistry or Chemical Engineering, alongside Physics and Chemistry, and the objectives and contents of their education can be very different from each other.</p> <p>Students following this course must:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Acquire the capacity to use the basic language to describe the structure and chemical bonding or organic and inorganic molecules, including non-bonding intermolecular interactions. 2. Acquire the capacity to use the basic language of Theoretical and Computational Chemistry relative to the previous item. 3. Acquire basic knowledge on the computation of thermodynamical properties from statistical concepts. 4. Acquire the capacity to use the basic language of structure and bonding in Solid State Physics. 5. Acquire the capacity to use the basic language to describe the electronic structure of solid systems

6. Acquire the capacity to use the basic language of Physical Optics in relation with the interactions between the electromagnetic radiation and solid systems.
7. Acquire the capacity to use the basic language to describe electric and magnetic properties of materials.

6.- DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

Número de orden:	1
Nombre de la U.T. (Castellano):	Conceptos básicos en química.
U.T. name (English):	Basics concepts in chemistry
Descripción de contenidos (Castellano):	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Principios de reactividad: Equilibrio químico (4 horas) <ol style="list-style-type: none"> a) Conceptos generales sobre disoluciones acuosas b) Introducción a las reacciones de ácido-base, oxidación-reducción y precipitación. 2. Química de coordinación (9 horas) <ol style="list-style-type: none"> a) Introducción b) Estructura de los compuestos de coordinación c) Teoría del enlace. d) Cinética y mecanismos de reacción de compuestos de coordinación. 3. Química orgánica:: (9 HORAS) <ol style="list-style-type: none"> a) Constitución de los compuestos orgánicos: esqueleto hidrocarbonado y grupos funcionales. Reglas básicas de nomenclatura. Conceptos estereoquímicos básicos: Quiralidad y actividad óptica. Conformación y configuración. Enantiómeros y diastereoisómeros. b) Deslocalización electrónica Resonancia. Aromaticidad. Propiedades ácido-base de los compuestos orgánicos: Relación estructura acidez c) Estructura tridimensional: estereoquímica y quiralidad. 4. Determinación estructural (4 horas). <ol style="list-style-type: none"> a) Conceptos de Simetría. Grupos de simetría. b) Vibraciones en Moléculas. Espectroscopia de infrarrojo y Raman. Espectros de IR de compuestos orgánicos e inorgánicos: Zonas de vibración características. Factores que influyen sobre las frecuencias de grupo. Principales grupos funcionales y frecuencias características. Enlace de hidrógeno. Frecuencias características de compuestos de coordinación y organometálicos. Modo de coordinación de ligandos. Estereoquímica en torno al átomo central. c) Otras Espectroscopias y Espectrometrías. Resonancia Magnética Nuclear. Aspectos generales. Descripción básica del fenómeno de la RMN. Desplazamiento Químico. Espectrometría de Masas. Fundamentos. Técnicas experimentales en espectrometría de masas. 	

Descripción de contenidos (English):

1. Principles of reactivity: Chemical equilibria (**4 hours**)
 - 1.1. General concepts in aqueous solutions
 - 1.2. Introduction to acid-base, oxidation-reduction, complex formation and precipitation reactions
2. Coordination Chemistry (**9 hours**)
 - 2.1 Introduction
 - 2.2. Structures of the coordination compounds
 - 2.3 Bond theory
 - 2.4. Kinetics and reaction mechanisms in coordination compounds
3. Organic Chemistry (9 hours)
 - 3.1. Constitution of organic compounds: hydrocarbon backbone and functional groups. Basic rules of nomenclature. Basic concept on stereochemistry: Chirality and optical activity. Conformation and configuration. Enantiomers and diastereoisomers.
 - 3.2. Electronic delocalization. Resonance. Aromaticity. Acid-base properties of organic compounds. Structure-acidity relationship.
 - 3.3. 3D structure: Stereochemistry and chirality.
4. Structure determination (4 hours)
 - 4.1. Concepts on symmetry. Symmetry groups.
 - 4.2. Vibrations in molecules. Infrared and Raman spectroscopies. IR spectra of organic and inorganic compounds. Characteristic vibration zones. Factors controlling frequency groups. Main functional groups and characteristic frequencies. Hydrogen bonding. Characteristic frequencies of coordination and organometallic compounds. Ligand coordination. Stereochemistry around a central atom.
 - 4.3. Other spectroscopies and spectrometries. Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spectroscopy. General aspects. Basic description of NMR phenomena. Chemical shift. Mass Spectrometry. Fundamentals. Experimental techniques in mass spectrometry.

Número de orden:	2
Nombre de la U.T. (Castellano):	Conceptos básicos en física
U.T. Name (English):	Basics concepts in physics.

Descripción de contenidos (Castellano):

1. Estructura Cristalina y Espacio Recíproco (6 horas)
 - 1.1. Interacciones entre los átomos de un sólido
 - 1.2. Estructura cristalina: celda unidad y redes de Bravais
 - 1.3. Técnicas de difracción y espacio recíproco
 - 1.4. Seminario
2. Vibraciones en Moléculas y Cristales (4 horas)
 - 2.1. Pequeñas oscilaciones alrededor del equilibrio
 - 2.2. Modos normales de vibración en moléculas
 - 2.3. Sistemas infinitos. Ecuación de ondas. Fonones en cristales.
 - 2.4. Oscilaciones amortiguadas, forzadas y resonancia.
 - 2.5. Seminario (1 hora)
3. Estructura Electrónica de Sólidos (8 horas)
 - 3.1. Introducción a la Física Cuántica. Función de Ondas. Operadores y Estados. Amplitudes de probabilidad. Ecuación de Schrödinger.
 - 3.2. Confinamiento cuántico y estados ligados.
 - 3.3. Bandas en sólidos. Masa efectiva. Densidad de Estados.
 - 3.4. Seminario.
4. Electromagnetismo en la materia (8 horas)

- 4.1. Fuerzas eléctrica y magnética sobre cargas en movimiento. Fuerza de Lorentz.
- 4.2. Electrostática: Ley de Gauss.
- 4.3. Magnetostática: Ley de Ampère.
- 4.4. Inducción electromagnética: Ley de Faraday.
- 4.5. Ecuaciones de Maxwell y ondas electromagnéticas.
- 4.6. Constante dieléctrica y polarización: Conductores y dieléctricos.
- 4.7. Susceptibilidad magnética y propiedades magnéticas de los sólidos.
- 4.8. Seminario.
5. Propiedades físicas de los sólidos (4 horas)
 - 5.1. Transporte de carga: Modelo de Drude y Ley de Ohm.
 - 5.2. Propiedades ópticas de los sólidos. Absorción y emisión de luz. Transiciones Interbanda. Plasmones.
 - 5.3. Propiedades mecánicas de los sólidos: Elasticidad y módulo de Young.
 - 5.4. Seminario.

Descripción de contenidos (English):

1. Crystal structure and reciprocal space (6 hours)
 - 1.1. Interactions among the atoms in a solid
 - 1.2. Crystal structure: unit cell and Bravais lattices.
 - 1.3. Diffraction techniques and reciprocal space
2. Vibrations in molecules and crystals (4 hours)
 - 2.1. Small oscillations around the equilibrium
 - 2.2. Normal vibrational modes in molecules
 - 2.3. Infinite systems. Wave equation. Phonons in crystals.
 - 2.4. Damped and forced oscillations. Resonances.
3. Electronic structure of solids (8 hours)
 - 3.1. Introduction to Quantum Physics. Wave function. Operators and states. Probability amplitudes. Schrödinger equation.
 - 3.2. Quantum confinement and bound states.
 - 3.3. Bands in solids. Effective mass. Density of States.
4. Electromagnetism in materials (8 hours)
 - 4.1. Electric and magnetic forces on charges in motion
 - 4.2. Electrostatics: Gauss' Law.
 - 4.3. Magnetostatics: Ampere's Law
 - 4.4. Electromagnetic induction: Faraday's law.
 - 4.5. Maxwell equation and electromagnetic waves.
 - 4.6. Dielectric constant and electric polarization in materials: Conductors and dielectrics.
 - 4.7. Magnetic susceptibility and magnetic properties of solids
5. Physical properties of solids (4 hours)
 - 5.1. Charge transport: Drude's model and Ohm's law.
 - 5.2. Optical properties of solids. Absorption and emission of light. Interband transitions. Plasmons.
 - 5.3. Mechanical properties of solids. Elasticity and Young's modulus.
 - 5.4. Seminar

7.- VOLUMEN DE TRABAJO / WORKLOAD

Actividad	Activity	Horas/ Hours/ Hores
Presencial	In-person	
Asistencia a clases de teoría	Evaluation and/or exam.	40
Seminarios teóricos/participativos.	Research work exposition and public defense.	12
Tutorías sobre las clases teóricas	Exams study and preparation.	8
No presencial	Not in-person	
Preparación y estudio clases teoría	Laboratory experimental work	30
Elaboración de trabajos en grupo	Research work presentation preparation.	60
Total presenciales	Total in-person	60
Total no presenciales	Total not in-person	90
Total	Total	150

8.- METODOLOGÍA DOCENTE / TEACHING METHODOLOGY

METODOLOGÍAS DOCENTES	TEACHING METHODOLOGY
Clases teóricas lección magistral participativa	Theory classes, participatory lectures
Discusión de artículos.	Articles discussion.
Debate o discusión dirigida.	Chaired debate or discussion.
Discusión de casos prácticos o problemas en seminario.	Practical cases or seminar problems discussion.
Seminarios.	Seminars.
Desarrollo de trabajos individuales.	Individual works development.

9.- EVALUACIÓN / EVALUATION

EVALUACIÓN	EVALUATION	
Asistencia y participación activa en los seminarios.	Attendance and active participation in seminars.	10-20%
Evaluación continua.	Continuous evaluation.	10-20%
Resolución de cuestiones.	Questions answering	10-20%
Realización de un trabajo individual.	Individual work development.	60-70%

10.- REFERENCIAS / REFERENCES**10.1 Básicas/Basic**

- R.H. Petrucci. QUIMICA GENERAL : PRINCIPIOS Y APLICACIONES MODERNAS 11. Ed. Pearson. 2017
Guía docente M1 - 54070 pág. 10
- Martin Silberberg, Patricia Amateis . Chemistry: The Molecular Nature of Matter and Change 8th Edition. 2017. MacGrawHill. 2017. ISBN1259631753
- L Cademartiri, G. A. Ozin, Principles of Nanochemistry John Wiley & Sons, 2009 .
- P.J. Collings, Liquid Crystals: Naturers delicate of Mater. 2ª Ed., Princenton University Press,

2002.

- E.H Wichmann, B.P.C. Física cuántica (Curso de Física de Berkeley) · 2020
- C. Kittel, P. McEuen · Introduction to Solid State Physics. Wiley. 2018
- Ulman, An Introduction to Ultrathin Organic Films: from Langmuir-Blodgett to Self-Assembly, Academic Press, San Diego, 1991.
- Allen J. Bard, Integrated Chemical Systems: A Chemical Approach to Nanotechnology, Wiley, John & Sons, 1994.
- Nanoscopic Materials. Emil Roduner. RSC Publishing, 2006

10.2 Complementarias

- (UT 1.1) Petrucci. Química general e inorgánica. Tomo 1
- (UT 1.2) Glen E. Rodgers. Química Inorgánica. Introducción a la Química de la Coordinación, del estado sólido y descriptiva. Capítulos 1 a 5
- (UT 1.3.) J. E. McMurry, Organic Chemistry, 8th Edition; Brooks/Cole, 2012
- P. Y. Bruice, Química Orgánica, 8ª Edición; Pearson-Prentice Hall, México, 2008
- (UT 1.4.) "Spectrometric Identification of Organic Compounds", R.M. Silverstein, F.X. Webster, D. Kiemle, 7th Ed., John Wiley and Sons, 2004. "Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds", K. Nakamoto, 6th Ed., John Wiley and Sons, 2009. Libro de tablas: "Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos". E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Affolter, A. Herrera, R. Martínez, Editorial Masson, Barcelona, 2004.